

(12)特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局(43) 国際公開日  
2005 年 9 月 9 日 (09.09.2005)

PCT

(10) 国際公開番号  
WO 2005/083616 A1(51) 国際特許分類<sup>7</sup>: G06F 19/00,  
G01N 33/48, 33/566, 33/68

(21) 国際出願番号: PCT/JP2005/003558

(22) 国際出願日: 2005 年 2 月 24 日 (24.02.2005)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:  
特願2004-048767 2004 年 2 月 24 日 (24.02.2004) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 株式会社インシリコサイエンス (IN-SILICO SCIENCES, INC.) [JP/JP]; 〒1450065 東京都大田区東雪谷二丁目 15 番 9 号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 梅山 秀明

(UMEYAMA, Hideaki) [JP/JP]; 〒2790011 千葉県浦安市美浜 1-7-1002 Chiba (JP). 渡邊 佳晃 (WATANABE, Yoshiaki) [JP/JP]; 〒4120026 静岡県御殿場市東田中 15125-D Shizuoka (JP). 荒井 亮一 (ARAI, Ryoichi) [JP/JP]; 〒3530003 埼玉県志木市下宗岡 4-31-45 Saitama (JP).

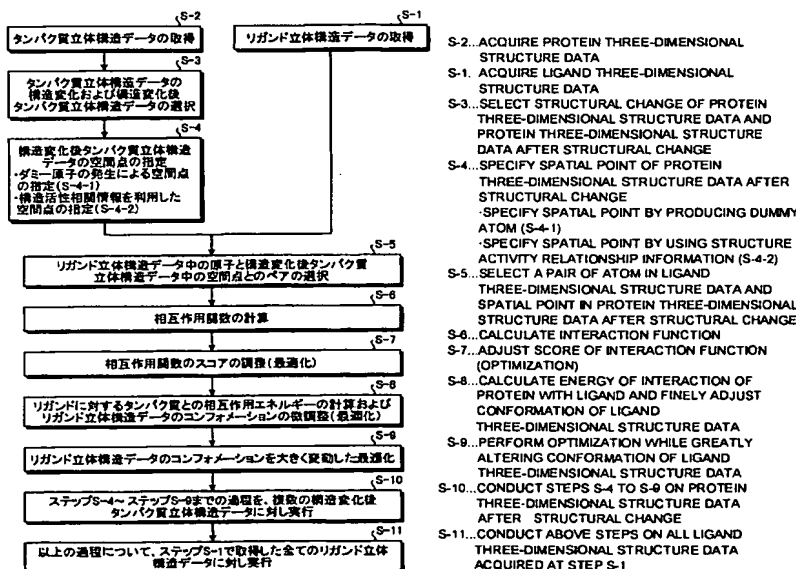
(74) 代理人: 酒井 宏明 (SAKAI, Hiroaki); 〒1000013 東京都千代田区霞が関三丁目 2 番 6 号 東京倶楽部ビルディング 酒井国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

[続葉有]

(54) Title: LIGAND SEARCHING DEVICE, LIGAND SEARCHING METHOD, PROGRAM, AND RECORDING MEDIUM

(54) 発明の名称: リガンド探索装置、リガンド探索方法、プログラム、および記録媒体



(57) Abstract: A ligand searching device for researching analysis of a receptor-ligand bond. The receptor can be an induced-fit receptor. A ligand searching method, a program, and a recording medium are also disclosed. Analysis calculation of the fundamental vibration of a receptor is conducted, and the fluctuation of the main chain dihedral angle of the receptor in a steady state is calculated. Molecular dynamics calculation is conducted while restraint based on the fluctuations is laid on each atom. Thus, the dynamic structure of a receptor is predicted with higher accuracy. Further, by using the dynamic structure determined by molecular dynamics calculation and an interaction function, the receptor/ligand bond applicable to an induced-fit receptor is predicted with high accuracy.

[続葉有]

WO 2005/083616 A1

**WO 2005/083616 A1**

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告書
- 請求の範囲の補正の期限前の公開であり、補正書受領の際には再公開される。

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

(57) 要約: 本発明は、誘導適合型受容体も含めた受容体／リガンド結合の解析を研究するためのリガンド探索装置、リガンド探索方法、プログラム、および記録媒体を提供することを目的とする。本発明は、受容体の基準振動解析計算をまず行い、定常状態の受容体の主鎖二面角の揺らぎを計算する。そして、その揺らぎを基にした拘束を各原子にかけながら分子動力学計算を行うことでより精度の良い受容体の動的構造を予測する。また、本発明は、分子動力学計算より得た動的構造及び相互作用関数を用いることで、誘導適合型受容体にも応用できる受容体／リガンド結合を精度良く予測する。